凝聚态物理探究式教学案例集

十三个可复算案例 含教师解答与模型局限

物理学院 研究生课程教学材料 2026 年 11 月

案例的课堂使用

本案例集收录 13 个可复算的凝聚态物理问题。每个案例列出物理假设、参数、求解步骤、核验结果和适用条件，供课堂研讨、平时作业和专题报告选用。

教师先给出问题与参数，请学生记录预测并完成计算。研讨时对照不同解法，重点讨论哪些结论依赖模型假设，以及怎样利用实验或独立计算检验这些结论。

案例一 电阻率与散射时间的反演

讲义定位：T1、T9

问题：从室温 ρ 推 τ，并检验单带磁阻。参数 $n=8.5\times10^{28}\ m^{-3}$、$\rho=1.7\times10^{-8}\ \Omega\ m$、T=300 K，m=m_e。假设单一球形费米面、各向同性且能量无关的弛豫时间。

求解：先算 τ=m/(ne²ρ)，再求 kF=(3π²n)^(1/3)、EF=ħ²kF²/(2m)、vF=ħkF/m 和 ℓ=vFτ。得到 $\tau\approx2.456\times10^{-14}$ s、EF≈7.049 eV、$v_F\approx1.575\times10^{6}$ m/s、ℓ≈38.7 nm。由完整电导矩阵求逆，单电子带 ρxx=m/(ne²τ)与 B 无关。

教师解答与局限：τ 不是只由 ρ 决定，而是依赖输入 n 和有效质量。σxx 下降被 Hall 分量的张量求逆抵消，不能把 1/σxx 当 ρxx。金属实际磁阻可来自多带、费米面各向异性、散射和量子效应，本例没有否定实验磁阻。学生必须列出参数依赖和单位链。

案例二 补偿磁阻与 Hall 并存

讲义定位：T9、T10

问题：零净电荷补偿是否等于零 Hall？采用 p=n、ue=1、uh=0.5 m²/(V s)，两类载流子独立 Drude 响应。

求解：分别构造电导后相加再求逆，得到 ρxx/ρ0=1+ueuhB²以及 ρyx=B(uh−ue)/[en(ue+uh)]。2 T 时比值 3，5 T 时比值 13.5；磁阻分别 200%和 1250%。ρyx 仍非零，因为迁移率不同。作为非补偿对照，取 p/n=0.8 且 ue=uh=1，5 T 时比值 19.87，高场趋向 81。

教师解答与局限：两个对照同时改变了迁移率，不应直接把数值高低只归因于补偿；公平检验补偿应固定迁移率再扫 p/n。拟合应联合 ρxx 和 ρyx 并引入独立密度约束。Nernst 还需热电张量与温度边界，不能从 Hall 非零直接推出 Nernst 非零。

案例三 方格子的 DOS 峰和反铁磁背景

讲义定位：B4、M7

问题：为什么同一跃迁模型既产生 DOS 峰又为有限波矢磁性提供条件？取 t=1、a=1，最近邻方格色散 $\varepsilon=-2(\cos kx+\cos ky)$。

求解：Γ、X、M 点能量为−4、0、4。半填充 μ=0，费米线为连接 X 点的菱形；每自旋占据半个布里渊区。X 附近 $\varepsilon\approx qy^2-qx^2$，双曲线等能面产生对数 DOS 峰。对 Q=(π,π)有 $\varepsilon(k+Q)=-\varepsilon(k)$，所以折叠后相反能量态可被反铁磁平均场耦合。

教师解答与局限：DOS 应按每原胞每自旋归一为 1。先加密网格再减小 Lorentz 展宽，否则伪峰会被误判。加入 t′=0.2 使鞍点能量为 0.8 且破坏完全嵌套；这并不允许继续无条件使用 μ=0 的半填充结论。高 DOS 既影响磁性也影响配对，不能仅凭峰值决定有序类型。

案例四 石墨烯的密度与回旋质量

讲义定位：B5、B7、T3

问题：线性色散如何给出可测的回旋质量？取 t=2.7 eV、键长 0.142 nm、载流子密度 10^{12} cm^{-2}，含两个自旋和两个谷。

求解：$v_F=3ta_0/(2\hbar)=8.737\times10^5$ m/s，$k_F=\sqrt{(\pi n)}=1.772\times10^8$ m^{-1}，$E_F=\hbar v_F k_F=0.1019$ eV。由面积 $A(E)=\pi[E/(\hbar v_F)]^2$ 求 $m_c=(\hbar^2/2\pi)\partial A/\partial E=|E_F|/v_F^2=0.0235m_e$。同一参数不能再混用 $v_F=10^6$ m/s 的能量数值。

教师解答与局限：Dirac“无质量”指低能哈密顿量无质量开隙项，不是任意实验质量都为零。若改研究 zigzag 带，需加入边界并检查递推|2cos(k∥a∥/2)|<1；体 DOS 与边缘 DOS 计数不同。栅极实际密度受电容、残余电荷和量子电容影响，这些未包含在模型输入中。

案例五 SSH 的两个端态

讲义定位：B8

问题：相同体能隙是否保证相同端态？固定 40 原胞、左 A 右 B 截断，对比(t1,t2)=(0.6,1)和(1,0.6)。

求解：周期能谱±√(t1²+t2²+2t1t2cos k)，两组参数体隙均 0.8。前者 q(k)绕原点一次，w=1，端态 A(j+1)=−0.6A(j)，概率比 0.36，定位长度 1.958 原胞。开链最接近零的两能级绝对值约 8.56×10⁻¹⁰；反向参数的最低绝对能量大于 0.39，没有同样端态。

教师解答与局限：低能态可能以左右端对称或反对称组合出现，应计算整个近简并子空间权重。加入 Δσz 后手征对称性破坏，端态不再钉在零能。改变原胞不等于改变物理边界；终止、参考真空和规范需同时说明。SSH 态是复费米子端态，不能称为 Majorana。

案例六 三种 QWZ 质量的 Chern 检验

讲义定位：B12、B13

问题：如何从解析质量、离散几何和条带三个方面检验同一拓扑结论？H=sin kx σx+sin ky σy+(m+cos kx+cos ky)σz。

求解：四个 Dirac 质量为 m+2、m、m、m−2，手性为+、−、−、+。下带 C 为其符号加权和的一半，因此 m=−1、1、3 分别给+1、−1、0。使用反向重叠、周期格点和主值通量在 21、41、81 网格上均得到相应整数；随机本征矢相位不改变结果。24 层开条带中 m=−1 存在跨隙边带，m=3 没有。

教师解答与局限：本课 A=i〈u|∂u〉，σxy=−Ce²/h，交换张量指标会改号。整数不是充分数值保证，必须查最小隙、相邻重叠和分支切口。质量临界 m=−2、0、2 处不能赋绝缘 Chern 数。加 d0I 不改几何却可能改变间接隙，材料输运还需费米能位于全局隙。

案例七 排斥 Hubbard 的反铁磁自洽

讲义定位：M4、M7

问题：求解半填充方格子的均匀 Néel 分支。取 t=1、U=4、T=0，m=(n↑−n↓)/2、Δ=Um，400×400 中点网格，混合 0.5。

求解：折叠矩阵对角元为±εk、非对角元−σΔ，能量±√(εk²+Δ²)。以完整区方程 m=(1/2N)ΣΔ/Ek 迭代，得到 m=0.345327、谱隙 2Δ=2.762616。原始哈密顿量每点能量为 U/4+Δ²/U−平均 Ek，得−0.797029，比顺磁参照低 0.175907。

教师解答与局限：漏掉 Δ²/U 双计数项会错排能量。m=0 是对称驻点，保持对称的迭代不会自行离开，因此要测试非零初值及稳定性。此解在选定平均场空间中较低，不证明精确多体基态；严格二维有限温的连续自旋对称长程序不能照搬平均场 Tc。可用二聚体精确解检查强耦合 J≈4t²/U 的适用范围。

案例八 Dietl 型载流子介导平均场

对应算例 M8。文献为 T. Dietl 等，Phys. Rev. B 63，195205（2001）。

问题：在明确缩减模型中估算空穴密度对 Tc 的作用。采用 a=0.5653 nm、x_eff=0.05、S=5/2、N0βpd=−1.2 eV、AF=1.2、TAF=0、m*=0.5m_e、p=0.35 nm^{-3}。

求解：N0=4/a^3=22.1423 nm^{-3}，kF=2.18020 nm^{-1}，EF=0.362198 eV，双自旋 DOS=1.44948 $eV^{-1}nm^{-3}$，βpd=−0.0541949 eV nm^3。代入 Tc=x_eff N0 S(S+1) βpd^2 AF D(EF)/(12kB)，得到 47.86 K。固定其他量，p 增大八倍使 Tc 加倍，x_eff 加倍也使 Tc 加倍。

教师解答与局限：原论文用六带价带、SOC、应变及自旋矩阵元；本案例只用单抛物线，所得 47.86 K 不是原论文图像重现。DOS 双自旋约定与因子 12 必须一致。强掺杂改变补偿、无序、局域化和有效磁离子比例，不能无限外推 p^(1/3)标度。报告须同时列出缩减了哪些自由度。

案例九　InAs/GaSb 量子阱的带间磁响应与全局能隙

对应算例 M9 和 M10。文献为 Q.-Z. Wang 等，Phys. Rev. Lett. 113，147201（2014）及其补充材料。

问题：能隙中的磁响应是否为零，质量反号是否足以保证 QAH 绝缘？先用两能级缩减 H=dxτx+dzτz，O=τz，取 dx=3、dz=4 meV。

求解：d=5 meV，带间矩阵元平方为 dx^2/d^2=0.36，两跃迁方向合计响应 dx^2/d^3=0.072 meV^{-1}。再用 M10 的 Appendix 参数和试探 q=0.3，得到 GE=1.0836、GH=−10.2900 meV，两个质量+0.6868 与−10.6868 meV。排序扫描四带后最小直接隙 1.3736 meV，但间接隙 −13.5129 meV，存在能带重叠。

教师解答与局限：DOS 为零只消除零温带内项，带间矩阵元仍可贡献。质量反号与全局绝缘是不同条件；若 O 为单位矩阵，带间响应反而为零。q 为外加试探值，未做磁化自洽；模型也忽略 BIA/SIA 等项，不能据此宣称否定或完全重现原论文。完整复算要解八带包络函数、投影交换并固定粒子数。

案例十 零磁矩与自旋极化电流

讲义定位：M11、M12、M13

问题：自旋劈裂为何可以在整个布里渊区相消，却在输运中留下方向性？取 δ=Ja(cos kx−cos ky)、Ja=0.10 eV。

求解：X 点 E↑−E↓=−0.40 eV，Y 点为+0.40 eV，对角线为零。C4 使 δ 反号，再配自旋 π 旋转恢复哈密顿量；对称积分给 N↑=N↓。低能椭圆模型等密度等 τ 时，Px=βa/α、Py=−βa/α。βa/α=0.2 给+20%与−20%，同时平衡净磁矩为零。

教师解答与局限：净磁矩是占据态积分，电导另有速度平方权重。这个实对角模型没有随 k 变化的本征自旋量子态，内禀 Berry 曲率为零，不能推出 AHE。打开 SOC 后应从自旋空间群限制回到适当磁空间群，重新检查简并和响应；模型效率不能写成真实器件效率。

案例十一 从 BCS 积分到固定密度配对

讲义定位：SC3、SC5

问题：比较常 DOS 弱耦合模型与真实晶格 DOS 对自洽的影响。第一组 ωD=kB=1、λ=0.30；第二组方格吸引 Hubbard t=1、U=3、n=0.8、T=0.05。

求解：第一组求临界积分和有限温正根，Tc=0.04044953、Δ0=0.07143890；T/Tc=0.5、0.8、0.9 时 Δ/Δ0 约 0.957004、0.711337、0.526620。有限截止比值 2Δ0/Tc=3.53225。第二组联合数方程与能隙方程得 μ̃=−0.55525120、Δ=0.80112295、裸 μ=−1.75525120。

教师解答与局限：第一个数值表由积分求根，不应拿 tanh 经验插值伪装为自洽计算。第二组 Hartree 位移 μ̃=μ+Un/2 需在能量表达中一致处理。均匀解与二维实际相位相干不同，较大的配对幅度不能独自证明较高实际转变温度。可用零温解析解、网格加密和数方程残差交叉验证。

案例十二 排斥配对与 d 波节点

讲义定位：SC11、SC12

问题：变号与有节点是否相同？两个口袋只有带间排斥时，线性配对核−λ[[0,1],[1,0]]的正本征值对应哪种态？

求解：对称向量(1,1)本征值−λ，反对称(1,−1)本征值+λ，故变号分支允许配对。不同 DOS 时 Δ1/Δ2=−√(ν2/ν1)，ν2=4ν1 给−2，两个口袋内仍可无节点。方格 d 波另取 t=1、μ=−1、Δd=0.2，同时解 ξ=Δ=0，得 kN=arccos(1/4)=1.318116，法向斜率 2.738613、切向斜率 0.273861，各向异性 10。

教师解答与局限：s±的符号变化发生在不同口袋之间，不要求单个口袋出现零点；d 波节点是费米面与配对零线交点。不能把某材料的幂律一项当作唯一配对证据，还应考虑杂质、多带和相位敏感测量。配对核模型说明可能机制，不是对所有铁基或铜氧化物材料的统一定量拟合。

案例十三 Kitaev 链的证据闭环

讲义定位：SC13、SC14、B8

问题：如何区分端部的低能态与可靠的模型拓扑判据？取 t=1、Δ=0.6，比较 μ=0.5 和 μ=3.0，链长 20、40、80。

求解：周期谱的闭隙在 μ=±2t，Majorana 数 sgn(μ²−4t²)在|μ|<2t 为负。开链 μ=0.5 时最低绝对能量约 1.31×10^{-6}、1.20×10^{-12}、低于 10^{-14}；μ=3.0 时为 1.034817、1.009610、1.002525。前者低能子空间前后各五格合计约 99.903%权重，后者趋向体隙 1。

教师解答与局限：检查厄米性、正负谱、体隙和空间定位，再以周期边界去除端态。机器精度以下只报告数值零。纳米线 Δ=0.20 meV、μ=0.10 meV、g=20 给理想阈值约 0.386 T，但母体超导、多子带、SOC 和无序可能改变实际条件。零偏压峰和小本征值都不是独立的 Majorana 实验证明。

跨案例复算索引与报告选题

推荐组合一为 B4 与 M7：从同一个方格能带出发，研究嵌套怎样进入磁性自洽。组合二为 B13 与 M10：比较局部质量、全局隙和 Chern 占据的差异。组合三为 M11 与 T8：区分平衡磁矩、速度权重与 Berry 曲率。组合四为 B8 与 SC13：比较普通端态与 Nambu 粒子空穴约束。组合五为 SC3 与 SC5：比较常 DOS 积分与固定密度晶格自洽。

每组选择一个组合，提出一个能通过改变单一假设回答的问题。最终报告应包括至少一个正例和一个反例，以及一项未能由现有模型排除的解释。教师评价的是问题是否清楚、证据是否可复算、结论是否与假设相称，不以结果是否“新奇”作为主要评分依据。